

01.4

## О перенормировке скорости Ферми в эпитаксиальном графене

© 3.3. Алисултанов

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва  
Институт физики им. Х.И. Амирханова ДагНЦ РАН, Махачкала, Россия  
Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия  
E-mail: zaur0102@gmail.com

Поступило в Редакцию 15 ноября 2012 г.

В рамках простой модели рассмотрено явление перенормировки скорости Ферми в эпитаксиальном графене, сформированном на поверхности полупроводниковой и металлической подложек.

Симметрия кристаллической решетки графена и валентность атомов углерода приводят к уникальным свойствам графена [1–4]. Последние, в первую очередь, есть следствие необычного спектра графена. Действительно, вблизи  $K$  точки зоны Бриллюэна графена, электроны обладают линейным дираковским спектром, т.е. являются безмассовыми. Подобно тому, как электроны, не обладающие линейным спектром, характеризуются эффективной массой, безмассовые частицы описываются другим важным параметром — эффективной скоростью. Для электронов графена этим параметром является скорость Ферми, которая в изолированном упорядоченном графене имеет значение порядка  $10^8$  cm/s [5]. Исследование влияния различных возмущений на эту величину представляет большой интерес. В недавней работе [6] было показано, что скорость Ферми в примесном графене увеличивается почти в полтора раза. С другой стороны, в недавней экспериментальной работе [7] показано, что в непосредственной окрестности точки Дирака действительно имеет место перенормировка скорости Ферми. Однако авторы этой работы сделали утверждение, что изменение скорости Ферми происходит за счет электрон-электронного взаимодействия, а влиянием примесей можно пренебречь. В данной работе мы рассмотрим явление перенормировки скорости Ферми в эпитаксиальном графене (ЭГ), сформированном на полупроводниковой и металлической подложках. Интерес к изучению ЭГ вызван несколькими причинами [8]. Во-пер-

вых, графеновый слой на поверхности металлов и полупроводников может быть рассмотрен в качестве эффективного контакта в приборных устройствах [9]. С другой стороны, для того чтобы в полной мере использовать свойства графеновых слоев в электронике, необходимо варьировать их структуру, химический состав, морфологию и т.д., что можно сделать с помощью соответствующей подложки.

Рассмотрение будет проводиться в рамках модели Давыдова, в которой ЭГ представляется в виде адсорбированных на подложке и выстроенных в гексагональную структуру атомов углерода [10–13]. Используя гамильтониан Андерсона, находим выражение для функции Грина (ФГ) адатома углерода:  $G_i^0 = (\varepsilon - \varepsilon_a - \Lambda(\varepsilon) - i\Gamma_c(\varepsilon))^{-1}$ , где  $\varepsilon_a = E_a + \vartheta \langle a_\sigma^+ a_\sigma \rangle$ ;  $\Gamma_c(\varepsilon) = \pi |V|^2 \rho(\varepsilon)$  — полуширина квазиуровня адатома углерода;  $\Lambda(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_c(\varepsilon') d\varepsilon' / (\varepsilon - \varepsilon')$  — функция сдвига, знак „P“ означает интегрирование в смысле главного значения,  $\rho(\varepsilon)$  — плотность состояний (ПС) подложки. ПС аппроксимируем следующим образом:  $\rho(\varepsilon) = \rho_0 \Theta(W_m - |\varepsilon|)$  — для металла,  $\rho(\varepsilon) = \rho_0 \Theta(|\varepsilon| - \Delta) \Theta(W_s - |\varepsilon|)$  — для полупроводника, где  $W_m$  и  $W_s$  — полуширина зоны разрешенных энергий металла и полупроводника соответственно,  $\Delta$  — полуширина запрещенной щели в энергетическом спектре полупроводника,  $\Theta(\varepsilon)$  — единичная функция Хевисайда. Тогда имеем:

$$\Gamma_c = \pi |V|^2 \rho_0 \Theta(W_m - |\varepsilon|) \text{ и } \Lambda = -|V|^2 \rho_0 \ln \left| \frac{\varepsilon - W_m}{\varepsilon + W_m} \right|$$

— для металла,

$$\Gamma_c = \pi |V|^2 \rho_0 \Theta(|\varepsilon| - \Delta) \Theta(W_s - |\varepsilon|) \text{ и } \Lambda = |V|^2 \rho_0 \left[ \ln \left| \frac{\Delta - \varepsilon}{\Delta + \varepsilon} \right| - \ln \left| \frac{\varepsilon - W_s}{\varepsilon + W_s} \right| \right]$$

— для полупроводника. Если представить подложку в виде двумерного электронного газа, то получим  $\rho_0 = mS_1/\pi\hbar^2$ , где  $S_1 = 3\sqrt{3}a^2/4$  — площадь подложки, соответствующая одному атому графена,  $m$  — эффективная масса электрона подложки. Из условия нормировки тогда легко получить  $W_m = N_m \pi \hbar^2 / 2mS_1$ ,  $W_s = (N_s + 2\Delta) \pi \hbar^2 / 2mS_1$ , где  $N_m$  и  $N_s$  — число электронов, участвующих в формировании зоны Бриллюэна металла и полупроводника соответственно. Между адатомами углерода, выстроенными в гексагональную структуру, происходит обмен электронами, а следовательно формируется зона Бриллюэна. Для определения

возмущенной ФГ воспользуемся уравнением Дайсона в приближении сильной связи:  $G_{if} = G_i^0 \delta_{ij} + \sum_l G_i^0 t_{il} G_{lj}$ , где  $t_{il} = t$  — матричный элемент перехода электрона на ближайшие соседние атомы (для изолированного графена  $t \approx 2.8$  eV). Применяя к уравнению Дайсона фурье-преобразование и учитывая, что  $G_i^0 = G_0$ , получим

$$G_q^{-1}(\varepsilon) = G_0^{-1}(\varepsilon) - tf(\mathbf{q}), \quad (1)$$

где функция  $f(\mathbf{q})$  определена следующим образом:

$$f(\mathbf{q}) = v_b \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}q_x a) + 4 \cos(\sqrt{3}q_x a/2) \cos(3q_y a/2)},$$

$a$  — расстояние между ближайшими атомами в графене,  $\mathbf{q}$  — двумерный волновой вектор электронов графена,  $v_b$  — зонный индекс:  $v_b = +1$  соответствует зоне проводимости, а  $v_b = -1$  — валентной зоне. Вблизи точки Дирака с координатами  $\mathbf{Q} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$  для энергетического спектра получаем:  $tf(\mathbf{k}) = v_b 3ta|\mathbf{k}|/2 = v_b v_F \hbar |\mathbf{k}|$ , где  $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}$ .

Оценим изменение скорости Ферми. Перенормировка спектра определяется, как известно, массовым оператором  $\Sigma(\varepsilon)$ . Введем перенормированную энергию:

$$\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k + \text{Re}\Sigma(\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_k) \quad (2)$$

или

$$\tilde{\varepsilon}_k - \text{Re}\Sigma(\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_k) = \varepsilon_k, \quad (3)$$

где  $\varepsilon_k = v_b v_F \hbar |\mathbf{k}|$ . Беря произвольную по  $\mathbf{k}$  от выражения (3), получим

$$\frac{d}{d\tilde{\varepsilon}_k} (\tilde{\varepsilon}_k - \text{Re}\Sigma(\varepsilon = \tilde{\varepsilon}_k)) \frac{d\tilde{\varepsilon}_k}{d\mathbf{k}} = \frac{d\varepsilon_k}{d\mathbf{k}}, \quad (4)$$

или, учитывая, что  $d\tilde{\varepsilon}_k/d\mathbf{k} = \hbar\tilde{v}_F$ ,  $d\varepsilon_k/d\mathbf{k} = \hbar v_F$ , получим

$$\frac{\tilde{v}_F}{v_F} = \left( \frac{d}{d\varepsilon} (\varepsilon - \text{Re}\Sigma(\varepsilon)) \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F} \right)^{-1}, \quad (5)$$

где  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми графена, отсчитанная от середины зоны (в случае металлической подложки) или середины запрещенной щели (в случае полупроводниковой подложки). В данном случае, как легко

понять,  $\text{Re}\Sigma = \Lambda(\omega)$ ,  $\text{Im}\Sigma = \Gamma_c(\omega)$ . Тогда для случая металлической подложки имеем

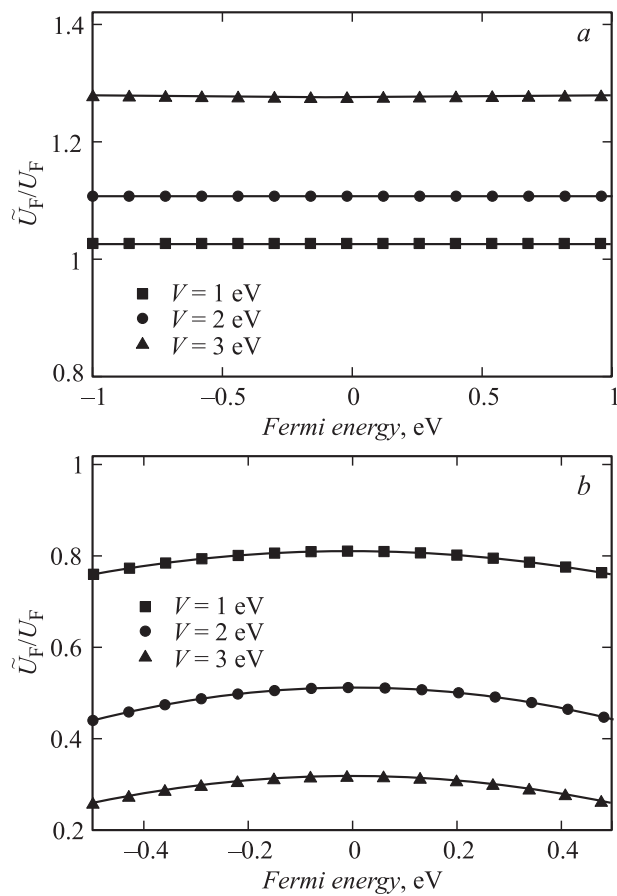
$$\frac{\tilde{v}_F}{v_F} = \left(1 - \frac{2W_m\rho_0|V|^2}{W_m^2 - \varepsilon_F^2}\right)^{-1}, \quad (6)$$

а для полупроводниковой подложки

$$\frac{\tilde{v}_F}{v_F} = \left(1 + \frac{2\Delta\rho_0|V|^2}{\Delta^2 - \varepsilon_F^2} - \frac{2W_s\rho_0|V|^2}{W_s^2 - \varepsilon_F^2}\right)^{-1}. \quad (7)$$

Следует отметить, что выражение (6) в приближении широкой зоны (модель Андерсона) дает  $\tilde{v}_F/v_F = 1$ . Далее примем, что  $W_m = W_s = 10 \text{ eV}$ . На рис. 1, *a* показана зависимость величины  $\tilde{v}_F/v_F$  для случая металлической подложки от энергии Ферми при различных значениях потенциала гибридизации. На рис. 1, *b* показана зависимость величины  $\tilde{v}_F/v_F$  для случая полупроводниковой подложки от энергии Ферми при различных значениях потенциала гибридизации. При построении кривых условно принято, что  $\Delta = 1 \text{ eV}$ . Как видно из этих рисунков, скорость Ферми в ЭГ, сформированном на металле, увеличивается. Для полупроводниковой же подложки имеем обратный эффект — скорость Ферми уменьшается. По-видимому, здесь важную роль играет наличие или отсутствие щели в энергетическом спектре. Необходимо также отметить, что в случае вырожденного полупроводника, когда  $\varepsilon_F > \Delta$ , мы имеем металлический случай.

Легко сообразить, что при  $\varepsilon_F \rightarrow W_m, W_s, \Delta$  получаются некоторые нефизические результаты: обращение скорости Ферми в нуль на краю зоны разрешенных энергий, отрицательная скорость Ферми при  $\varepsilon_F > W_m, W_s$  вблизи краев зоны разрешенных энергий. Очевидно, что эти результаты являются следствием используемой ступенчатой аппроксимации плотности состояний подложки. Здесь следует отметить, что, согласно экспериментальным данным  $\varepsilon_F \ll W_m, W_s$ . Поэтому мы коротко остановимся лишь на особенностях, имеющих место при  $\varepsilon_F \rightarrow \Delta$ . Рассмотрим, что даст отклонение от ступенчатой аппроксимации. Будем исходить из следующих соображений. Ступенчатая аппроксимация плотности состояний соответствует, очевидно, случаю отсутствия в подложке затухания квазичастиц. Плотность состояний субстрата с учетом затухания квазичастиц мы определим в приближе-

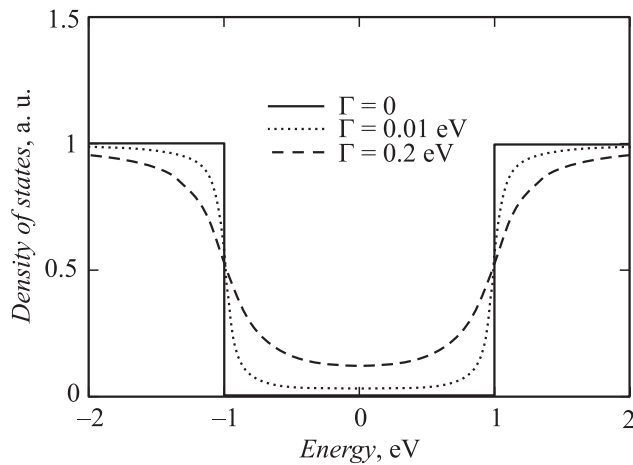


**Рис. 1.** Зависимость скорости Ферми электронов эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металла (a) и полупроводника (b) от энергии Ферми при различных значениях потенциала гибридизации.

нии эффективной массы с помощью спектральной функции

$$A(\omega, p) = \frac{\Gamma}{(\omega - p^2/2m)^2 + \Gamma^2}, \quad (8)$$

где  $\Gamma$  — энергия затухания квазичастиц,  $p$  — импульс квазичастиц подложки. Чтобы получить плотность состояний для зоны проводимо-



**Рис. 2.** Плотность состояний полупроводниковой подложки при учете затухания квазичастиц. Плотность состояний приведена в единицах  $\rho_0$ .

сти полупроводника, необходимо проинтегрировать выражение [8] по двумерному фазовому пространству. При этом необходимо поступить следующим образом: с помощью формулы  $\varepsilon = p^2/2m$  перейти от импульсного представления к энергетическому, а затем проинтегрировать от  $\Delta$  до  $\infty$ . Для валентной зоны необходимо перейти к переменной  $\omega \rightarrow -\omega$ . Таким образом, плотность состояний определится следующим образом:

$$\rho(\omega) = \pi^1 \rho_0 \int_{\Delta}^{\infty} [A(\omega, \varepsilon) + A(-\omega, \varepsilon)] d\varepsilon. \quad (9)$$

Проводя интегрирование, окончательно имеем

$$\rho(\omega) = \pi^{-1} \rho_0 \left[ \pi + \arctg \frac{\omega - \Delta}{\Gamma} - \arctg \frac{\omega + \Delta}{\Gamma} \right]. \quad (10)$$

На рис. 2 показана плотность состояний (10) для  $\Delta = 1$  eV. Легко сообразить, что при использовании аппроксимации (10) для плотности состояний обращение в нуль скорости Ферми на краю запрещенной щели снимается.

Необходимо отметить, что здесь мы полностью пренебрегли электрон-электронными взаимодействиями и показали, что один только факт взаимодействия графена с подложкой приводит к перенормировке скорости Ферми. Это интересно не только с формальной теоретической точки зрения. В работе [14] был экспериментально исследован вопрос о перенормировке скорости Ферми в графене, интеркалированном золотыми кластерами. Из-за того, что кластеры не являются непрерывной подложкой, электрон-электронным взаимодействием через подложку можно пренебречь. В [14] было показано, что скорость Ферми увеличивается более чем на 20%, что качественно согласуется с результатами настоящей работы (рис. 1, *a*).

В конце обратим внимание на следующий момент. Существенная зависимость скорости Ферми от химического потенциала при приближении последнего к краю запрещенной щели полупроводника имеет, вообще говоря, фундаментальную природу. Когда химический потенциал приближается к краю запрещенной щели в графене, возникает новый канал рассеяния квазичастиц, причем время релаксации существенно зависит от энергии (скачок плотности состояний), что и приводит к указанному эффекту. Отметим, что аналогичный эффект имеется в металлах вблизи электронного топологического перехода, когда химический потенциал приближается к критическому значению, при котором изменяется связность ферми-поверхности (см., например, [15]).

Автор искренне благодарен Федеральной Лезгинской Национально-Культурной Автономии (ФЛНКА) за оказанную поддержку.

## Список литературы

- [1] *Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R., Novoselov K.S., Geim A.K.* // *Rev. Mod. Phys.* 2008. V. 81. P. 109.
- [2] *Das Sarma S., Adam Sh., Hwang E.H., Rossi E.* // *Rev. Mod. Phys.* 2011. V. 83. P. 407.
- [3] *Goerbig M.O.* // *Rev. Mod. Phys.* 2011. V. 83. P. 1193.
- [4] *Kotov V.N., Uchoa B., Pereira V.M., Guinea F., Castro Neto A.H.* // *Rev. Mod. Phys.* 2012. V. 84. P. 1067.
- [5] *Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Katsnelson M.I., Grigorieva I.V., Dubonos S.V., Firsov A.A.* // *Nature.* 2005. V. 438. P. 197.
- [6] *Скрипник Ю.В., Локтев В.М.* // *Письма ЖЭТФ.* 2011. Т. 94. С. 605.

- [7] *Elias D.C., Gorbachev R.V., Mayorov A.S., Morozov S.V., Zhukov A.A., Blake P., Ponomarenko L.A., Grigorieva I.V., Novoselov K.C., Guinea F., Geim A.K.* // Nature Physics. 2011. V. 7. P. 701–704.
- [8] *Claire Berger, Zhimin Song, Tianbo Li, Xuebin Li, Asmerom Y. Ogbazghi, Rui Feng, Zhenting Dai, Alexei N. Marchenkov, Edward H. Conrad, Phillip N. First, Walt A. de Heer* // J. Phys. Chem. B. 2004. V. 108. P. 19912–19916.
- [9] *Lua W., Mitchel W.C., Thorntona C.A., Collinsa W.E., Landis G.R., Smith S.R.* // J. Electrochemical Society. 2003. V. 150. P. G177.
- [10] *Давыдов С.Ю.* // Письма в ЖТФ. 2011. В. 37. С. 64; ФТП. 2011. В. 45. С. 629; ФТП. 2011. В. 45. С. 1102.
- [11] *Давыдов С.Ю.* // ФТП. 2013. В. 47 (1). С. 97–106; Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. В. 2. С. 7–14.
- [12] *Алисултанов З.З., Мейланов Р.П.* // ФТТ. 2012. Т. 54. С. 1398; ФММ. 2012. Т. 113. С. 1504; ТМФ. 2012. Т. 172. С. 455.
- [13] *Алисултанов З.З., Гарнов С.В., Мейланов Р.П.* // ФТТ. 2012. Т. 54. С. 2237.
- [14] *Nair M.N., Cranney M., Vonau F., Aubel D., Le Fevre P., Tejada A., Bertran F., Taleb-Ibrahimi A., Simon L.* // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 245 421.
- [15] *Blanter Ya.M., Kaganov M.I., Pantsulaya A.V., Valamov A.A.* // Phys. Rep. 1994. V. 245. P. 159.